

低放射化フェライト鋼における主要析出物中の水素の挙動  
～第一原理計算によるアプローチ～

**Hydrogen behavior in primary precipitate in RAFM steel**  
**~Theoretical approach with the first principle calculation~**

渡辺淑之<sup>1</sup>, 岩切宏友<sup>2</sup>, 村吉範彦<sup>2</sup>, 加藤太治<sup>3</sup>  
Y. Watanabe<sup>1</sup>, H. Iwakiri<sup>2</sup>, N. Murayoshi<sup>2</sup>, D. Kato<sup>3</sup>

<sup>1</sup>原子力機構, <sup>2</sup>琉球大, <sup>3</sup>核融合研  
<sup>1</sup>JAEA, <sup>2</sup>Univ of Ryukyus, <sup>3</sup>NIFS

### 1. 諸言

低放射化フェライト鋼 (RAFM) は、核融合炉ブランケット構造材料として期待されている。近年のさまざまな実験により、RAFM中の主要析出物である $M_{23}C_6$ 炭化物 ( $M = Cr, Fe$ ) がその内部に水素同位体を大量に捕獲する可能性が指摘されているが、その機構論的な理解は十分に得られていない。本研究では、核融合炉の寿命評価や事故時のリスク評価のための技術開発に貢献することを目的とし、 $Cr_{23}C_6$ 析出物の水素同位体捕獲挙動を機構論的に明らかにすることを目指す。

### 2. 手法

密度汎関数法に基づいた第一原理計算コードSIESTA [1]を用いた。まず、 $Cr_{23}C_6$ の完全結晶 (図1) の最安定構造を求めるためにE-V曲線 (系のトータルエネルギーと体積の関係) を計算より求め、完全結晶の最適格子定数を算出した。続いて、得られた最適格子定数で構成された完全結晶内の格子間位置に水素原子を配置し、構造緩和計算を行った。その際、結晶の対称性を考慮しつつ、数パターンの初期配置を設定して水素を導入した。得られた系のトータルエネルギー値や水素分子の全エネルギー値を基に $Cr_{23}C_6$ における水素の捕獲エネルギー (結合エネルギー) を算出するとともに、捕獲機構の電子論的解釈を試みた。

### 3. 結果および考察

図2は、 $Cr_{23}C_6$ スーパーセルにおける体積とトータルエネルギーの計算値を示している。曲線の最小値における完全結晶が最もエネルギー的に安定であり、このときの格子定数 (最適格子定数) は10.75 Åであった。これは、実験値 (10.66 Å) と非常に良い一致を示しており、同計算コードの有用性が確認された。また、 $Cr_{23}C_6$ 中における格子間水素の結合エネルギー値は0.58 eVであった。これは、 $Cr_{23}C_6$ 中に水素が比較的安定に捕獲されることを意味している。当日は、他の格子間サイトにおける水素の結合エネルギー値や格子間水素周辺の電子配置の解析 (Mullikenの電子密度解析) 結果についても詳細に報告する。

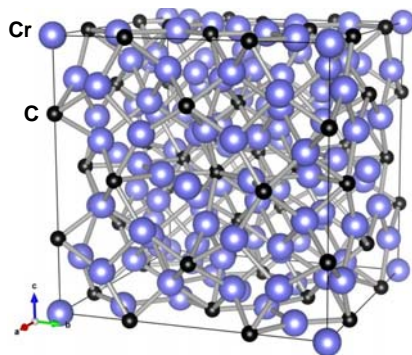


図1  $Cr_{23}C_6$ の結晶構造 (立方晶: Fm-3m)

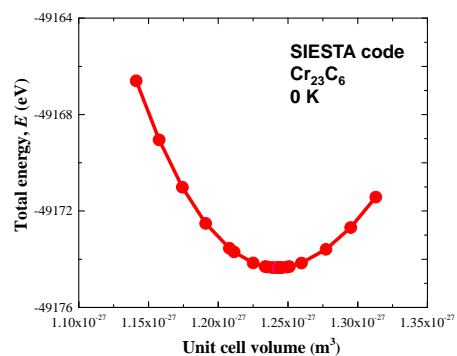


図2  $Cr_{23}C_6$  完全結晶のE-V曲線